
Quantenchemie

Übungsblatt 4

1. Stickstoff und Neon

Optimieren sie zunächst die Moleküle Stickstoff und Neon. Dies soll innerhalb der Dichtefunktionaltheorie im Rahmen der Local-density approximation (LDA) geschehen. Dazu wird das Slater Exchange Functional und das Vosko, Wilk und Nusair Correlation Functional benötigt. Desweiteren muss ein Basissatz angegeben werden, diese fügen sie einfach hinter das Funktional (durch einen Slash getrennt) ein.

Berechnen sie die geometrieoptimierten Abstände der beiden Moleküle für die Basissätze 3-21G, 6-21G und die bei den Hartree-Fock Rechnungen des letzten Übungszettels gewählt. Bestimmen sie für diese Basissätze die Eigenfrequenzen. Vergleichen sie die Ergebnisse untereinander und mit den Werten der zuvorigen Übungszettel.

(vgl http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/k_dft.htm)

2. Graphische Darstellung

Stellen sie von beiden Molekülen die Ladungsdichte und die besetzten und die niedrigsten unbesetzten Molekülorbitale mit dem Programm `xcrysden` graphisch da. Erstellen sie ein Molekülorbitalspektrum. Die Energiewerte der einzelnen Orbitale sind bei den vorherigen Rechnungen bereits mit ausgegeben worden.

3. Das Potential von Stickstoff

Berechnen sie erneut das Potential für Stickstoff unter der Verwendung der LDA und geeignetem Basisatz aus Aufgabe 1 in Abhängigkeit des Abstandes. Gibt es Unterschiede zum Verlauf des Potentials bei der Hartree-Fock Methode?

Anmerkungen:

Extrahieren der (wenn vorhanden: optimierten) Molekülgeometrie geht mit:
`babel -i g09 BEISPIEL.log -o xyz BEISPIEL.xyz`

Graphische Darstellung ist z.B. mit einem der folgenden Befehle möglich:
`xcrysden --xyz BEISPIEL.xyz`

In letzteres Programm können auch gaussian cubefiles zum veranschaulichen von Molekülorbitalen/Dichten/etc. geladen werden. Dazu zuerst die checkpoint Datei mit `formchk BEISPIEL.chk` in eine formatierte checkpointfile (.fchk) umwandeln. Aus dieser Datei kann dann durch das Tool `cubegen` (http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/u_cubegen.htm) eine `BEISPIEL.cube` Datei mit den gewünschten Daten erstellt werden. Eingabe von `xcrysden` startet das Programm:

File → Open Structure → Gaussian98 Cube File → `BEISPIEL.cube` auswählen. Das Molekül wird nun dargestellt. Um nun die Daten des Cubefiles darzustellen, wie folgt vorgehen: Tools → Data Grid → OK → *Now play around*